

Síntese enzimática de bioaromas a partir de óleo essencial de citronela (*Cymbopogon winterianus*) e ácido propiônico.

Natalia Paroul (PG)^{*1,2}, Luana P. Grzegozeski (IC)¹, Viviane Chiaradia (IC)¹, Helen Treichel (PQ)¹, Daniel Emmerich (PQ)¹, Rogério Cansian (PQ)¹, Débora de Oliveira (PQ)¹. nparoul@uri.com.br

¹ URI – Campus de Erechim – Centro de Ciências Exatas - Av. Sete de Setembro, 1621 – 99700-000 – Erechim – RS

² UCS – Instituto de Biotecnologia – Rua Francisco Getúlio Vargas, 1130 – 95070-560 – Caxias do Sul - RS

Palavras Chave: *Cymbopogon winterianus*, óleo essencial, ácido propiônico, esterificação, Novozym 435

Introdução

O óleo de citronela é usado na área de perfumaria, fabricação de velas, cremes e loções. Este óleo é rico em geraniol e citronelol. Ésteres obtidos a partir álcoois terpênicos via biotransformação podem ser amplamente utilizados nas indústrias de alimentos, cosméticos e em formulações farmacêuticas¹. Este trabalho teve como objetivo estudar a produção de bioaromas através de reações de esterificação catalisadas pela lipase de *Candida antarctica* usando como substratos geraniol e citronelol, presentes no óleo essencial da citronela, e ácido propiônico.

Resultados e Discussão

A composição química do óleo essencial de citronela foi determinada por Cromatografia Gasosa e Espectrometria de Massa (CG/EM) e apresentou o citronelal (35,3%) como composto majoritário, seguido do geraniol (21,9%) e do citronelol (10,9%). Como as reações de esterificação são favoráveis aos álcoois primários (geraniol e citronelol), as concentrações dos mesmos foram monitoradas durante os ensaios. Para determinação das condições experimentais que maximizem a síntese de ésteres foi realizado um planejamento fatorial completo 2³ com triplicata do ponto central. As variáveis avaliadas foram: temperatura, razão molar óleo:ácido e concentração de enzima. O tempo da reação foi fixado em 6 horas. A quantificação foi feita por cromatografia gasosa e os resultados obtidos são apresentados na Tabela 1.

A análise estatística dos dados experimentais da conversão do citronelol e geraniol mostrou que com 95% de confiança, pode-se afirmar que todas as variáveis tiveram efeitos significativos, sendo que a razão molar e temperatura apresentaram efeitos negativos enquanto a concentração de enzima teve efeito significativo positivo ($p < 0,05$). Estes fatos indicam que altas taxas de produção podem ser mantidas à temperatura 40°C e razão molar 1:1, permitindo economia dos reagentes e energia. Já um aumento na concentração de enzima pode aumentar o rendimento.

Os dados obtidos permitiram a obtenção de dois modelos codificados otimizados para a conversão enzimática de citronelol e geraniol em função das variáveis estudadas (Equações 1 e 2).

Tabela 1. Matriz do planejamento experimental 2³ completo com as respostas em termos de área de citronelil propionato e geraniol propionato

T (°C)	RM óleo/ácido	Enzima (%m/m)	Citronelil propionato (%)	Geraniol propionato (%)
40	1:1	1	30,26	65,44
60	1:1	1	55,43	77,91
40	1:5	1	31,26	66,09
60	1:5	1	26,9	63,94
40	1:1	10	90,72	95,4
60	1:1	10	92,95	96,51
40	1:5	10	86,77	93,47
60	1:5	10	53,78	77,20
50	1:3	5	63,18	81,60
50	1:3	5	62,69	81,35
50	1:3	5	63,25	81,63

$$\text{Conversão de citronelol (\%)} = 59,74 - 1,24 \cdot T - 8,83 \cdot \text{RM} + 22,54 \cdot E - 8,09 \cdot T \cdot \text{RM} - 6,44 \cdot T \cdot E - 1,94 \cdot \text{RM} \cdot E \quad (1)$$

$$\text{Conversão de geraniol (\%)} = 80,05 - 0,60 \cdot T - 4,32 \cdot \text{RM} + 11,15 \cdot E - 4,00 \cdot T \cdot \text{RM} - 3,18 \cdot T \cdot E - 0,99 \cdot \text{RM} \cdot E \quad (2)$$

Conclusões

Devido à presença de dois álcoois monoterpênicos, citronelol e geraniol, o óleo essencial de citronela pode ser usado como matéria prima em síntese de bioaromas via esterificação enzimática em sistemas livres de solventes. Os melhores resultados em termos de conversão em ésteres de ácido propiônico foram atingidos a temperatura 60°C, razão molar óleo essencial:ácido propiônico de 1:1 e 10% de concentração de enzima, com rendimento da reação 92,9% para citronelil propionato e 95,5% para geraniol propionato em 6 horas de reação.

Agradecimentos

URI-Campus de Erechim, CNPq, Capes e Fapergs pelo suporte financeiro e concessão de bolsas.

¹Kashi, F.J.; Fooladi, J. e Bayat, M. *Pakistan J. Biol. Science.* **2007**, 10: 1685-1690..